

Análise Comparativa das Derivadas de Caputo e Riemann-Liouville Aplicadas à Equação Estacionária de Difusão-Advecção-Reação: Uma Abordagem via Método de Galerkin

João P. A. Barros¹

PPG-CompMat/UERJ, Rio de Janeiro, RJ

Cristiane O. de Faria², Carlos A. de Moura³

UERJ, Rio de Janeiro, RJ

Jhoab P. de Negreiros⁴

Associação Brasileira de Educadores Lassalistas, Niterói, RJ

Resumo. Neste trabalho, realiza-se uma análise comparativa entre as formulações da equação estacionária de difusão-advecção-reação fracionária, com derivadas de Riemann-Liouville e de Caputo aplicadas ao termo difusivo. Desenvolve-se a formulação variacional do problema, cuja abordagem fracionária é implementada por meio do método de Galerkin, com o objetivo de comparar os esquemas correspondentes às diferentes definições de derivadas fracionárias. A solução numérica é obtida com base nesse método, e testes computacionais são realizados para ambos os operadores, especificamente para o caso em que suas formulações coincidem. São considerados diferentes valores para a ordem fracionária e, por fim, é conduzido um teste de refinamento da malha.

Palavras-chave. Equação Estacionária de Difusão-Advecção-Reação, Derivada Fracionária de Caputo, Derivada Fracionária de Riemann-Liouville, Método de Galerkin

1 Introdução

A equação de difusão-advecção-reação constitui uma ferramenta fundamental na modelagem de fenômenos físicos, químicos e biológicos, nos quais o transporte de substâncias é influenciado simultaneamente por processos de difusão, escoamento (advecção) e reações locais. Pode-se citar como exemplo de aplicação os estudos de [1] e [2] que utilizaram esta equação para análise do processo de dispersão de poluição em meio aquático.

Este estudo, de caráter exploratório, tem como objetivo complementar a investigação apresentada no III Simpósio Brasileiro de Cálculo Fracionário, na qual foi abordada a equação de difusão-advecção-reação com a derivada de Caputo aplicada ao termo difusivo. Na ocasião, foram analisados diferentes cenários por meio da variação da ordem da derivada de Caputo, realizados testes de refinamento da malha e foi investigada a influência do número de Péclet sobre a solução.

A comparação entre as formulações da equação estacionária de difusão-advecção-reação fracionária, utilizando o método de Galerkin, constitui uma etapa relevante para o aprofundamento da análise numérica com derivadas fracionárias. São considerados os casos em que a derivada de Caputo é aplicada ao termo difusivo e comparados aos resultados obtidos com a derivada

¹jpab_7@hotmail.com

²cofaria@ime.uerj.br

³demoura@ime.uerj.br

⁴jhoabnegreiros@gmail.com

de Riemann-Liouville [3, 4]. Inicialmente, comparam-se as matrizes globais resultantes de cada abordagem; em seguida, investiga-se o caso particular em que ambas as definições de derivada fracionária se tornam equivalentes.

2 Operadores Fracionários

Nesta seção, apresentam-se as definições dos operadores fracionários utilizados ao longo deste estudo.

Definição 2.1. A derivada de Caputo à esquerda de ordem $\beta > 0$ de uma função dada $f(x)$, onde $x \in (x_L, x_R)$, é definida como:

$${}_C D_{x_L, x}^\beta f(x) = \frac{1}{\Gamma(m - \beta)} \int_{x_L}^x (x - s)^{m-\beta-1} f^{(m)}(s) ds, \quad (1)$$

onde m é o menor número inteiro positivo maior que β ($m - 1 \leq \beta < m$).

Definição 2.2. A derivada de Riemann-Liouville à esquerda de ordem $\beta > 0$ de uma função dada $f(x)$, onde $x \in (x_L, x_R)$, é definida como:

$${}_R L D_{x_L, x}^\beta f(x) = \frac{1}{\Gamma(m - \beta)} \frac{d^m}{dx^m} \int_{x_L}^x (x - s)^{m-\beta-1} f(s) ds, \quad (2)$$

onde m é o menor número inteiro positivo maior que β ($m - 1 \leq \beta < m$).

Seja f uma função suficientemente diferenciável. Então, a derivada fracionária de Caputo de f de ordem β está relacionada à derivada fracionária de Riemann-Liouville de $f(x)$ de ordem β , pela seguinte fórmula [5, 6]:

$${}_R L D_{x_L, x}^\beta f(x) = {}_C D_{x_L, x}^\beta f(x) + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{f^{(k)}(x_L)(x - x_L)^{k-\beta}}{\Gamma(k - \beta + 1)}, \quad (3)$$

onde $f^{(k)}(x_L)$ representa a k -ésima derivada de f no ponto $x = x_L$.

3 Problema Modello

Seja $\Omega = (0, 1)$, formula-se a equação unidimensional e estacionária de difusão-advecção-reação fracionária como:

$$-a \left({}_C D_{0,x}^{2-\beta} u(x) \right) + \mathbf{b} \cdot \nabla u(x) + cu(x) = f(x), \quad (4a)$$

$$u(0) = 0, \quad (4b)$$

$$u(1) = 1, \quad (4c)$$

onde define-se $2 - \beta$ como a ordem da derivada fracionária de Caputo à esquerda ($0 \leq \beta < 1$), a é o coeficiente de difusão ($a > 0$), b é o campo de velocidade, c é o coeficiente de decaimento e $f(x)$ é o termo fonte.

3.1 Formulação Variacional

Seja $u \in H^\alpha(\Omega)$ onde $\alpha = 1 - \frac{\beta}{2}$, e a função teste $v \in V$, tal que:

$$V = \{v \in H^\alpha(\Omega), v(0) = v(1) = 0\}.$$

Multiplicando (4a) por v e integrando em Ω , obtemos:

$$\int_0^1 -a(CD_{0,x}^{2-\beta} u)v + b\nabla u v + cu v \, dx = \int_0^1 f v \, dx. \quad (5)$$

Aplicando a integração por partes no termo da derivada fracionária, obtemos:

$$a(CD_{0,x}^\gamma u, \nabla v)_\Omega + (b\nabla u, v)_\Omega + (cu, v)_\Omega = (f, v)_\Omega, \quad (6)$$

onde $(\cdot, \cdot)_\Omega$ é o produto interno no espaço Ω e $\gamma = 1 - \beta$.

3.2 Método de Galerkin

Seja $\Omega = [x_L, x_R]$ um domínio finito, define-se S_h uma partição uniforme de Ω , dada por:

$$x_L = x_0 < x_1 < \dots < x_{m-1} < x_m = x_R, \quad m \in \mathbb{Z}^+. \quad (7)$$

Denota-se $\Delta x = |x_{i-1} - x_i|$ e $\Omega_i = [x_{i-1}, x_i]$ para $i = 1, 2, \dots, m$, e em seguida o espaço de elementos finitos V_h como o conjunto de funções polinomiais por partes na malha S_h , expresso como

$$V_h = \{v : v|_{\Omega_i} \in P_1(\Omega_i), v \in C(\Omega)\},$$

onde $P_1(\Omega_i)$ é o espaço de polinômios lineares definidos em Ω_i e $V_h \subset V$. As funções $\phi_1, \dots, \phi_{m-1}$ de V_h utilizadas são funções lagrangeanas lineares por partes [7].

Para a definição dos termos envolvendo a derivada fracionária de Caputo, é necessário estabelecer alguns lemas preliminares; os demais termos são obtidos de forma análoga ao caso de ordem inteira.

Lema 3.1. Para $i = 1, 2, \dots, m-1$, temos:

$$CD_{x_L, x}^\gamma \phi_i(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_{x_L}^x (x-s)^{-\gamma} \nabla \phi_i(s) ds$$

e obtemos

$$CD_{x_L, x}^\gamma \phi_i(x) = \lambda \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq x_{i-1}, \\ (x-x_{i-1})^{1-\gamma}, & \text{se } x_{i-1} \leq x \leq x_i, \\ -2(x-x_i)^{1-\gamma} + (x-x_{i-1})^{1-\gamma}, & \text{se } x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ (x-x_{i+1})^{1-\gamma} - 2(x-x_i)^{1-\gamma} + (x-x_{i-1})^{1-\gamma}, & \text{se } x > x_{i+1}, \end{cases}$$

onde $0 < \gamma < 1$ e $\lambda = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)(\Delta x)}$.

Em (6), o objetivo é obter $u_h \in V_h$ tal que:

$$a(CD_{0,x}^\gamma u_h, \nabla v_h)_\Omega + (b\nabla u_h, v_h)_\Omega + (cu_h, v_h)_\Omega = (f, v_h)_\Omega, \quad \forall v_h \in V_h. \quad (8)$$

Substituindo $u_h = \sum_{j=1}^{m-1} c_j \phi_j(x)$ e $v_h = \phi_i(x)$, tal que, $i = 1, \dots, m-1$, obtemos:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{m-1} c_j \left[(a {}_C D_{0,x}^\gamma \phi_j(x), \nabla \phi_i(x))_\Omega + (b \nabla \phi_j(x), \phi_i(x))_\Omega + (c \phi_j(x), \phi_i(x))_\Omega \right] \\ & = (f, \phi_i(x))_\Omega. \end{aligned} \quad (9)$$

Lema 3.2. Para $i = 1, 2, \dots, m-1$, temos:

$$a \int_{x_{i-1}}^{x_i} {}_C D_{0,x}^\gamma \phi_j(x) (\nabla \phi_i(x)) dx + a \int_{x_i}^{x_{i+1}} {}_C D_{0,x}^\gamma \phi_j(x) (\nabla \phi_i(x)) dx = g_{i,j} \quad (10)$$

e essa relação implica que

$$g_{i,j} = \tau_1 \begin{cases} k_{i-j} - k_{i-j+1}, & \text{se } j \leq i-2, \\ 2^{2-\gamma} - 3 - k_2, & \text{se } j = i-1, \\ 4 - 2^{2-\gamma}, & \text{se } j = i, \\ -1, & \text{se } j = i+1, \\ 0, & \text{se } j \geq i+2, \end{cases} \quad (11)$$

define-se $k_n = -(n-2)^{2-\gamma} + 3(n-1)^{2-\gamma} - 3n^{2-\gamma} + (n+1)^{2-\gamma}$ e $\tau_1 = \frac{a}{\Gamma(3-\gamma)\Delta x^\gamma}$.

A matriz global é construída com base nos conceitos previamente estabelecidos, sendo expressa a seguir:

$$M_{i,j} = \begin{cases} \tau_1(k_{i-j} - k_{i-j+1}), & \text{se } j \leq i-2, \\ \tau_1(2^{2-\gamma} - 3 - k_2) + \frac{b}{2} + \frac{c\Delta x}{6}, & \text{se } j = i-1, \\ \tau_1(4 - 2^{2-\gamma}) + \frac{2c\Delta x}{3}, & \text{se } j = i, \\ -\tau_1 - \frac{b}{2} + \frac{c\Delta x}{6}, & \text{se } j = i+1, \\ 0, & \text{se } j \geq i+2. \end{cases} \quad (12)$$

É importante destacar que a matriz global obtida é idêntica à encontrada na modelagem do problema utilizando a derivada fracionária de Riemann-Liouville [3, 4]. Além disso, observa-se que, à medida que β tende a zero, a matriz global da formulação fracionária converge para a matriz global correspondente ao caso de ordem inteira.

Por fim, a etapa final consiste na resolução do sistema linear com a imposição das respectivas condições de fronteira:

$$MC = F, \quad (13)$$

em que M representa a matriz global, C é o vetor de incógnitas a ser determinado e F corresponde ao vetor força global.

3.3 Experimentos Numéricos

Seja $\Omega = (0, 1)$, $u(x) = x^2$ a solução exata do problema, $a = 1$, $b = 0,05$, $c = 10^{-8}$ e 60 nós. Sendo assim, pretende-se determinar a concentração $u(x)$, tal que:

$$-a \left({}_C D_{0,x}^{2-\beta} u(x) \right) + b \nabla u(x) + cu(x) = -\frac{2ax^\beta}{\Gamma(\beta+1)} + 2bx + cx^2, \quad (14a)$$

$$u(0) = 0, \quad (14b)$$

$$u(1) = 1. \quad (14c)$$

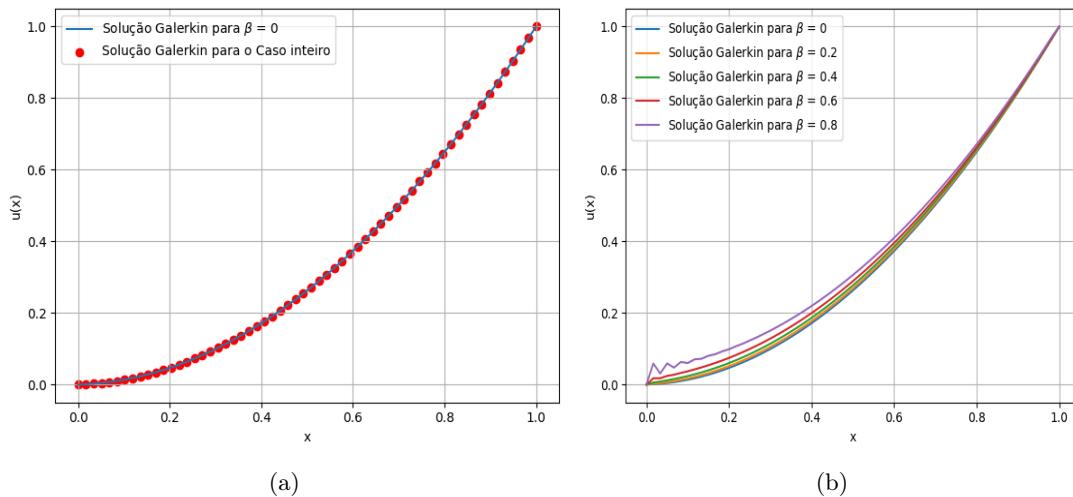


Figura 1: Em (a) o teste comparando o resultado de $\beta = 0$ para a derivada de Caputo à esquerda no termo difusivo com o caso inteiro e, em (b), o teste variando a ordem para diferentes valores de β utilizando a derivada de Caputo à esquerda. Fonte: Elaborada pelos autores.

A Figura 1a exibe o teste realizado para o caso $\beta = 0$ e o caso de ordem inteira. Os resultados encontrados são bastante próximos, o que era esperado, pois quando β tende a 0, o caso de ordem inteira é recuperado. Na Figura 1b, que apresenta o teste variando os valores de β , é possível notar que, à medida que o valor de β aumenta, a solução do problema começa a se distanciar do caso inteiro.

Tabela 1: Teste variando a ordem da derivada de Caputo à esquerda.

Ordem da derivada ($2 - \beta$)	β	Erro na norma L^2	Tempo de execução do código
1,2	0,8	0,04809341	0,1300
1,4	0,6	0,03075610	0,1500
1,6	0,4	0,02034649	0,1200
1,8	0,2	0,01368293	0,1500
2,0	0,0	0,00925591	0,0300
Caso inteiro	-	0,00925737	0,0069

Os resultados da Tabela 1 indicam que o erro aumenta à medida que o valor de β tende a 1. Observando o tempo de execução, ele é significativamente menor no caso inteiro (0,0069 s) em comparação aos casos fracionários (aproximadamente 0,15 s). Nota-se que embora o caso $\beta = 0$ apresente erro equivalente ao do caso inteiro, o tempo de execução é cerca de quatro vezes maior, o que evidencia o custo computacional adicional associado à abordagem fracionária.

Os resultados obtidos para este problema utilizando a derivada de Caputo são equivalentes aos resultados obtidos com a derivada de Riemann-Liouville no termo difusivo, para cada ordem específica. Aplicando a relação entre as derivadas fracionárias de Riemann-Liouville e Caputo e substituindo pela solução exata dada no problema proposto, obtemos:

$${}_{RL}D_{0,x}^{2-\beta}x^2 = {}_CD_{0,x}^{2-\beta}x^2 + \sum_{k=0}^1 \frac{u^{(k)}(0)}{\Gamma(k-2+\beta+1)} x^{k-2+\beta}, \quad (15)$$

onde $u^{(k)}(0)$ representa a k -ésima derivada de $u(x)$ avaliada em $x = 0$. Assim, a contribuição do somatório se reduz a zero, pois tanto $u(0)$ quanto $u'(0)$ são nulos. Consequentemente, a derivada fracionária de Riemann-Liouville à esquerda pode ser expressa de forma equivalente à derivada fracionária de Caputo à esquerda:

$${}_{RL}D_{0,x}^{2-\beta}x^2 = {}_CD_{0,x}^{2-\beta}x^2. \quad (16)$$

Dessa forma, ao resolver problemas utilizando a abordagem unidimensional e estacionária da equação de difusão-advecção-reação por meio do método de Galerkin, a implementação dos operadores de Riemann-Liouville e Caputo pode, efetivamente, gerar para cada ordem específica resultados equivalentes. Para isto acontecer depende de condições específicas, para este problema, se o termo fonte é igual, ocorre a equivalência, visto que as matrizes globais encontradas são equivalentes. Dessa forma, o problema (14a) é equivalente ao seguinte problema:

$$-a\left({}_{RL}D_{0,x}^{2-\beta}u(x)\right) + \mathbf{b} \cdot \nabla u(x) + cu(x) = -\frac{2ax^\beta}{\Gamma(\beta+1)} + 2bx + cx^2, \quad (17a)$$

$$u(0) = 0, \quad (17b)$$

$$u(1) = 1. \quad (17c)$$

A Tabela 2 apresenta os resultados numéricos obtidos para o caso com derivada de Riemann-Liouville, os quais se mostram análogos aos resultados referentes ao problema (14a).

Tabela 2: Teste variando a ordem da derivada de Riemann-Liouville à esquerda.

Ordem da derivada ($2 - \beta$)	β	Erro na norma L^2	Tempo de execução do código
1,2	0,8	0,04809341	0,1300
1,4	0,6	0,03075610	0,1500
1,6	0,4	0,02034649	0,1200
1,8	0,2	0,01368293	0,1500
2,0	0,0	0,00925591	0,0300
Caso inteiro	-	0,00925737	0,0069

Por fim, realizou-se o teste de refinamento para o problema modelo utilizando Caputo. Seja $u = x^2$ a solução exata do problema, $a = 1$, $b = 0,05$, $c = 10^{-8}$ e $\beta = 0,4$.

Tabela 3: Teste de Refinamento.

Nós	Erro na norma L^2	Tempo de execução (segundos)
60	0,02034649	0,15
120	0,02009188	0,85
240	0,02000665	3,11
480	0,01997892	10,73
960	0,01996983	41,09
1920	0,01996685	170,61

Analisando o teste de refinamento dado na Tabela 3, notamos que o erro diminui lentamente com o refinamento da malha, passando de 0,02034649 (60 nós) para 0,01996685 (1920 nós). Observando o tempo de execução, dado em segundos, podemos notar que à medida que aumenta-se o número de nós, o custo computacional aumenta, ocasionando um tempo de execução maior.

4 Considerações Finais

Os resultados obtidos ao longo deste estudo permitiram uma análise detalhada das implicações numéricas do uso das derivadas fracionárias de Caputo e de Riemann-Liouville na equação estacionária de difusão-advecção-reação. A aplicação do método de Galerkin mostrou-se eficaz para a formulação variacional do problema e para a comparação entre os dois operadores. Observou-se que, apesar das semelhanças estruturais, as soluções numéricas apresentam diferenças sensíveis conforme a definição da derivada fracionária empregada, sobretudo quando se considera a influência da ordem fracionária e dos parâmetros físicos envolvidos. Em particular, a equivalência teórica entre os operadores em determinados cenários foi validada numericamente, reforçando a consistência das formulações.

A análise realizada também pode ser estendida para problemas transientes e aplicações em áreas como controle de processos, modelagem de materiais com memória e sistemas biológicos. Assim, reafirma-se a importância da modelagem fracionária e dos métodos numéricos no avanço da compreensão e solução de problemas que envolvem fenômenos de natureza não local e com efeitos de memória.

Agradecimentos

Agradecimentos à FAPERJ - Brasil, por financiar o projeto de doutorado.

Referências

- [1] M. F. B. Prestes, J. F. C. A. Meyer e E. C. C. Poletti. “Dispersão de material impactante em meio aquático: Modelo matemático, aproximação numérica e simulação computacional - Reservatório de Salto Grande Americana - SP”. Em: **Biomatemática (Unicamp)** 56 (2013), pp. 23–46. ISSN: 1679-365X.
- [2] J. P. A. Barros, C. O. Faria e J. F. C. A. Meyer. “Simulação computacional para o problema de dispersão de poluição na lagoa Rodrigo de Freitas”. Em: **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics** (2021). DOI: 10.5540/03.2021.008.01.0473.
- [3] L. Feng, P. Zhuang, F. Liu, I. Turner e Y. Gu. “Finite element method for space-time fractional diffusion equation”. Em: **Numerical Algorithms** 72 (2016), pp. 749–767. DOI: 10.1007/s11075-015-0065-8.
- [4] J. P. A. Barros, C. O. Faria, C. A. de Moura e J. P. de Negreiros. “Comparação do método de Galerkin para a equação estacionária de difusão-advecção-reação de ordem inteira e não-inteira”. Em: **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics** (2025). DOI: 10.5540/03.2025.011.01.0363.
- [5] I. Podlubny. “Geometric and Physical Interpretation of Fractional Integration and Fractional Differentiation”. Em: **arXiv: Classical Analysis and ODEs** (2001). arXiv:math/0110241.
- [6] A. A. A. Kilbas, H. M. Srivastava e J. J. Trujillo. **Theory and Applications of Fractional Differential Equations**. Elsevier Science & Tech, 2006. ISBN: 978-0444518323.
- [7] M. A. Rincón e L. Ishih. **Introdução ao método de Elementos Finitos - Computação e Análise em Equações Diferenciais Parciais**. Rio de Janeiro: UFRJ, 2013. ISBN: 978-65-86502-00-8.